MÉCANIQUE QUANTIQUE I

Chapitre 4 :

LES POSTULATS DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

I. CARACTERISATION D'UN SYSTEME QUANTIQUE
   1) Postulats
   2) Conditions quantiques. Règle de symétrisation

II. POSTULATS SUR LA MESURE
   1) Principe de "quantification"
   2) Principe de décomposition spectrale
   3) Principe de réduction du paquet d'ondes

III. EVOLUTION DANS LE TEMPS DE L'ETAT D'UN SYSTEME
   1) Postulat
   2) Cas du système conservatif

IV. VALEUR MOYENNE D'UNE GRANDEUR PHYSIQUE
   1) Définition
   2) Evolution dans le temps. Constante du mouvement

V. THEOREME DE HEISENBERG
   1) Relations de commutation
   2) Enoncé du théorème et démonstration
   3) Applications
      a) Relations d'incertitude spatiales
      b) Relation d'incertitude temporelle

A. Kaddouri

Janvier 2014

I. CARACTERISATION D'UN SYSTEME QUANTIQUE

1) Postulats

Pour décrire une particule en mécanique classique, on l'assimile en général à un point matériel de masse m; son mouvement est déterminé si l'on connaît, en fonction du temps, le vecteur position $\vec{r}(x, y, z)$ et le vecteur vitesse $\vec{v}(x, y, z)$. Toutes les grandeurs physiques (énergie, moment cinétique...) que l'on peut associer à la particule s'expriment en fonction de $\vec{r}$ $\vec{v}$. Une particule est définie si l'on connaît en particulier son énergie et son impulsion. Ainsi, en mécanique classique, la connaissance de l'état d'un système physique est équivalente à la connaissance des grandeurs associées. Cette équivalence n'a pas sens en mécanique quantique car on distingue l'état du système et les grandeurs physiques et on postule :

i) L'ETAT d'un système physique est défini, à un instant t fixe, par la donnée d'un ket $|\Psi\rangle$ appartenant à l'espace des états ξ; (espace de Hilbert).

Il faut noter que, comme ξ est un espace vectoriel, toute combinaison d'états possibles du système est aussi un état du système (principe de superposition). Par ailleurs, la normalisation des kets permet une interprétation physique.

ii) Une grandeur physique mesurable $\mathcal{A}$ est représentée par une OBSERVABLE A: opérateur linéaire, hermitique et dont les vecteurs propres forment une base orthonormée dans ξ. Cette observable agit sur les éléments $|\Psi\rangle$ de ξ.

Toute observable ayant un équivalent en mécanique classique se construit à partir des observables X, Y, Z, Px, Py, Pz (position et impulsion) par la règle de correspondance:

$$\mathcal{A}(x, y, z, p_x, p_y, p_z) \;==============> \mathbf{A}(X, Y, Z, P_x, P_y, P_z)$$

Cette correspondance entre l'expression des grandeurs physiques en mécanique classique et leur représentation opératoire en mécanique quantique, porte le nom de principe de correspondance.

2) Conditions quantiques. Règle de symétrisation

Entre les observables positions R_α et impulsions P_β, on établit sans difficulté, les relations de commutation suivantes :

$[R_\alpha , P_\beta] = i\hbar \mathbb{1}\, \delta_{\alpha\beta}$ avec $\alpha,\beta = x,y,z$ et en posant $R_x=X$, $R_y=Y$, $R_z=Z$

$[R_\alpha , R_\beta] = 0$ $\mathbb{1}$ étant l'opérateur identité

$[P_\alpha , P_\beta] = 0$

Ces conditions quantiques imposent une règle de symétrisation. En effet, on a:

$$xp_x = p_xx \qquad \text{alors que} \qquad XP_x \neq P_xX$$

De plus XP_x (ou P_xX) n'est pas un opérateur hermitique :

$$(XP_x)^+ = P_x^+ X^+ = P_xX \neq XP_x.$$

Il faut donc symétriser le produit en le remplaçant par $\frac{xp_x + p_xx}{2}$ et ensuite utiliser le principe de correspondance:

$$xp_x : \text{Symétrisation} \Rightarrow \frac{xp_x + p_xx}{2} \text{ et Principe de Correspondance} \Rightarrow \frac{XP_x + P_xX}{2}$$

En conséquence, pour représenter une grandeur physique mesurable $\mathcal{A}$ par une observable **A**, il faut préalablement symétriser, dans l'expression classique de $\mathcal{A}$, tous les produits de grandeurs dont les opérateurs représentatifs ne commutant pas.

On pourrait, à titre d'exercice, écrire l'opérateur **H** représentant la fonction de Hamilton $\mathcal{H}$ classique associée à une particule de masse m et de charge q plongée dans un champ électromagnétique $(\vec{\mathcal{E}},\vec{\mathcal{B}})$:

$$\mathcal{H}(\vec{r},\vec{p},t) = \frac{1}{2m}\left[\vec{p} - q\vec{\mathcal{A}}(\vec{r},t)\right]^2 + q\,\mathcal{U}(\vec{r},t)$$

où $\vec{\mathcal{A}}$ et $\mathcal{U}$ sont les potentiels vecteur et scalaire dont dérivent les champs $\vec{\mathcal{B}}$ et $\vec{\mathcal{E}}$ respectivement.

II. POSTULATS SUR LA MESURE

En mécanique classique la valeur, à un instant donné, des diverses grandeurs physiques est parfaitement déterminée lorsqu'on connaît l'état du système à cet instant et on peut prédire de façon certaine le résultat d'une mesure quelconque. La mécanique quantique rejette totalement ce point de vue en raison du comportement probabiliste associé au système physique. Elle considère que la connaissance de l'état du système ne permet que de prévoir la probabilité pour que la mesure d'une grandeur physique donne tel ou tel résultat. Cette attitude fondée sur des faits expérimentaux est à la base des principes suivants :

1) Principe de "quantification"

Énoncé***: Une mesure de la grandeur physique $\mathcal{A}$ ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres de l'observable A correspondante.***

Remarques :

- Une mesure de $\mathcal{A}$ est toujours réelle puisque A est par définition hermitique.

- Lorsque le spectre de A est discret, les valeurs mesurées de $\mathcal{A}$ sont alors des quantités discrètes; on dit que $\mathcal{A}$ est quantifiée. Ce principe n'implique pas que toutes les grandeurs sont quantifiées. Des observables représentant des grandeurs telles que la position, l'impulsion... ont des spectres continus.

2) Principe de décomposition spectrale

Ce principe donne la règle permettant de calculer la probabilité d'obtenir telle ou telle valeur propre de A. Supposons que le spectre de A est discret et soit $\{a_1,a_2,...a_n,....\}$ l'ensemble de ses valeurs propres que l'on considère simples et notons par $|\Phi_n\rangle$ le vecteur propre associé à a_n. Le principe est le suivant :

La probabilité $\mathcal{P}(a_n)$ d'obtenir a_n comme résultat de mesure de la grandeur $\mathcal{A}$ représentée par l'observable A est :

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle\Phi_n|\Psi\rangle|^2$$

où $|\Psi\rangle$ est l'état quantique normé du système au moment de la mesure de $\mathcal{A}$.

Conséquences :

* Si $|\Psi\rangle = |\Phi_n\rangle \rightarrow \mathcal{P}(a_n) = |\langle\Phi_n|\Phi_n\rangle|^2 = 1 \rightarrow$ le résultat de la mesure est connu avec certitude.

* Si $|\Psi\rangle \neq |\Phi_n\rangle$, on vérifie que $\sum\mathcal{P}(a_n) = 1$. En effet, comme **A** est observable, tout ket $|\Psi\rangle$ peut s'écrire : $|\Psi\rangle = \sum_n c_n|\Phi_n\rangle$ et, on a :

$$\sum_n \mathcal{P}(a_n) = \sum_n \left|\langle \Phi_n | \Psi \rangle\right|^2 = \sum_n \sum_m \left|\langle \Phi_n | c_m | \Phi_m \rangle\right|^2 = \sum_n \sum_m |c_m|^2 \langle \Phi_n | \Phi_m \rangle$$

$$= \sum_n \sum_m |c_m|^2 \delta_{nm} = \sum_n |c_n|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \text{ (si } |\Psi\rangle \text{ est normé à l'unité}$$

Remarques :

- Dans le cas où a_n est g_n fois dégénérée, $\mathcal{P}(a_n)$ est donnée par :

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \left|\langle \Phi_n^i | \Psi \rangle\right|^2$$

- Dans le cas d'un spectre continu, on définit une densité de probabilité $\rho(\alpha) = d\mathcal{P}(\alpha)/d\alpha$ où $d\mathcal{P}(\alpha)$ est la probabilité d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$.

Avec : $A\,|W_\alpha\rangle = \alpha |W_\alpha\rangle$ et $|\Psi\rangle = \int d\alpha\, c(\alpha) |W_\alpha\rangle$

$\rho(\alpha)$ est donnée par $|c(\alpha)|^2 = \left|\langle W_\alpha | \Psi \rangle\right|^2$ donc $d\mathcal{P}(\alpha)/ = \left|\langle W_\alpha | \Psi \rangle\right|^2 d\alpha$

3) Principe de réduction du paquet d'ondes

La mécanique quantique considère que lorsqu'on fait une mesure, on perturbe en général le système physique, c'est à dire que l'état quantique du système n'est plus le même après la mesure qu'avant. Ce principe indique quel serait l'état du système après la mesure.

Considérons un système physique dont l'état avant la mesure est décrit par le ket $|\Psi\rangle$ normé et supposons que l'on mesure sur ce système la grandeur A représentée par l'observable A. On sait que cette mesure ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres a_n de A. Quand a_n est une valeur propre simple de A, on postule :

Immédiatement après la mesure, l'état quantique du système est $|\Phi_n\rangle$ ***: vecteur propre de*** A ***associé à la valeur propre*** a_n ***et non plus*** $|\Psi\rangle$**. (**$|\Phi_n\rangle$ ***à un facteur de proportionnalité près*****).**

Conséquence :

Toute mesure ultérieure (mais avant que le système ait le temps d'évoluer) de $\mathcal{A}$ donnera alors de nouveau a_n mais cette fois avec certitude.

Dans le cas où a_n est g_n fois dégénérée, on postule qu'immédiatement après la mesure le système est dans l'état :

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |\Phi_n^i\rangle \qquad \text{avec} \qquad K = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2$$

En introduisant l'opérateur projection P_n des états sur le sous-espace propre ξ_n associé à a_n:

$$P_n = \sum_i |\Phi_n^i\rangle\langle\Phi_n^i| \quad ===> \quad P_n|\Psi\rangle = \sum_i c_n^i |\Phi_n^i\rangle \qquad \text{et} \qquad \langle\Psi|P_n|\Psi\rangle = \sum_i |c_n^i|^2$$

et, on peut énoncer le principe de réduction de paquet d'onde comme suit :

Immédiatement après la mesure, l'état du système est la projection normée de $|\Psi\rangle$ ***sur le sous-espace propre associé à*** a_n ***; soit :***

$$\frac{P_n|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|P_n|\Psi\rangle}}$$

Ainsi, on peut dire que le résultat de l'interaction du système avec l'appareil de mesure est en quelque sorte de "projeter" l'état du système sur le sous-espace propre associé à la valeur propre obtenue.

III. EVOLUTION DANS LE TEMPS DE L'ETAT D'UN SYSTEME

1) Postulat

Connaissant l'état quantique, $\left|\Psi_{t_0}\right\rangle$***, d'un système à un instant*** t_0***, l'état de ce même système à un instant*** t ***quelconque*** ($t_0<t$) ***est l'état solution de l'équation de Schrödinger :***

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\Psi_t\right\rangle = H(t)\left|\Psi_t\right\rangle$$

où $H(t)$***, le hamiltonien, est l'observable correspondant à l'énergie totale du système***.

<u>Conséquence</u> :

La norme du vecteur d'état d'un système reste constante au cours du temps. C'est là une condition nécessaire de cohérence de la théorie qui découle de l'hermiticité de l'hamiltonien H. En effet, on montre facilement que :

$$\frac{d}{dt}\left\langle\Psi_t\middle|\Psi_t\right\rangle = 0 \qquad \Longrightarrow \quad \text{Norme de } \left|\Psi_t\right\rangle = \text{constante}$$

<u>Remarques</u> :

* L'équation de Schrödinger est une équation différentielle du premier ordre en t, la connaissance des conditions initiales jointe à la résolution de l'équation permettent de déterminer sans ambiguïté l'état quantique du système à un instant t quelconque à condition qu'on n'effectue pas de mesure sur le système entre temps.

* Cette équation est linéaire, on vérifie bien que toute combinaison linéaire est aussi solution de l'équation.

* Si le système est soumis à un champ de force invariable dans le temps, le hamiltonien est indépendant du temps: $H(t) = H$.

2) Cas du système conservatif

Un système est dit conservatif si son hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps c'est à dire que son énergie potentielle est indépendante du temps.

Soient $\left|\Phi_n\right\rangle$ et E_n vecteur et valeur propres de l'observable H, donc $H\left|\Phi_n\right\rangle = E_n\left|\Phi_n\right\rangle$

H étant une observable ===> $\left|\Psi_t\right\rangle = \sum_n c_n(t)\left|\Phi_n\right\rangle$

avec : $c_n(t) = \left\langle\Phi_n\middle|\Psi_t\right\rangle$ et $\left\langle\Phi_n\middle|\Phi_m\right\rangle = \delta_{mn}$

En portant dans l'équation de Schrödinger, on établit facilement que l'état quantique $\left|\Psi_t\right\rangle$ s'écrit:

$$\left|\Psi_t\right\rangle = \sum_n c_n(t_0)e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\left|\Phi_n\right\rangle$$

La dépendance en t est alors parfaitement précisée.

<u>Remarque</u> : Pour déterminer $\left|\Psi_t\right\rangle$, on peut utiliser l'opérateur d'évolution $U(t,t_0)$;

soit : $\left|\Psi_t\right\rangle = U(t,t_0)\left|\Psi_{\mathbf{t}=0}\right\rangle$

On montre facilement que $U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$

Conséquence : **Etats stationnaires**

Si à $t=t_0$, on fait une mesure de l'énergie et si on obtient comme résultat E_k. Alors, selon le principe de réduction de paquet d'ondes, le système se trouve après cette mesure dans l'état $|\Phi_k\rangle$ et dans ce cas, l'évolution du système sera décrite par le ket :

$$|\Psi_t\rangle = e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar}|\Phi_k\rangle$$

Les vecteurs-kets $|\Psi_t\rangle$ et $|\Phi_k\rangle$ (=$|\Psi_{t_0}\rangle$) ne diffèrent l'un de l'autre que par un facteur de phase global : $e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar}$ et il est important de savoir que ces kets conduisent aux mêmes prévisions relatives aux résultas possibles de la mesure d'une grandeur quelconque attachée au système. Les états ainsi représentés sont donc physiquement indiscernables. De façon générale, deux kets qui ne diffèrent que par un facteur de phase global décrivent le même état. Dans ces conditions, si l'on effectue une mesure de l'énergie du système se trouvant dans l'état décrit par $|\Psi_t\rangle$, nous trouverons toujours (et avec exactitude) la valeur E_k, ce qui signifie que l'énergie du système reste constante au cours du temps. Il en est de même pour la probabilité de présence ou pour toute autre grandeur (ne dépendant pas explicitement du temps) que l'on peut associer au système. C'est pour cette raison que l'état quantique $|\Psi_t\rangle$ (ou $|\Phi_k\rangle$) est appelé état stationnaire. Il s'agit donc d'un état propre de l'hamiltonien H du système (rappelons que H est indépendant du temps) ayant cette propriété remarquable que l'énergie y est parfaitement déterminée et a une valeur constante au cours du temps.

Attention :

$e^{i\alpha_1}|\Psi_1\rangle$ représente le même état que $|\Psi_1\rangle$

$e^{i\alpha_2}|\Psi_2\rangle$ représente le même état que $|\Psi_2\rangle$

Mais :

$\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle = |\Psi\rangle$ ne décrit pas le même état que $\lambda_1 e^{i\alpha_1}|\Psi_1\rangle + \lambda_2 e^{i\alpha_2}|\Psi_2\rangle = |\varphi\rangle$

sauf si $\alpha_1 = \alpha_2 + 2n\pi$ (n entier) car dans ce cas, on aura :

$|\varphi\rangle = e^{i\alpha_1}(\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = e^{i\alpha_1}(|\Psi\rangle)$ qui décrit le même état que $|\Psi\rangle$.

Donc un facteur de phase n'affecte pas les prédictions physiques mais les phases relatives des coefficients d'un développement sont significatives.

IV. VALEUR MOYENNE D'UNE GRANDEUR PHYSIQUE

1) Définition

On sait que lorsqu'on effectue sur un système physique la mesure d'une grandeur $\mathcal{A}$ qui lui est associée, le résultat ne peut être en général prévu exactement. Les seuls résultats possibles sont les valeurs propres de l'observable A représentant la grandeur $\mathcal{A}$; le résultat de la mesure d'une grandeur a donc en général un caractère aléatoire. Des mesures répétées sur un système, toujours préparé dans le même état ou sur un ensemble de systèmes identiques occupant le même état, constituent donc un "ensemble statistique" sur lequel nous aurons à définir la probabilité pour que le résultat de la mesure d'une grandeur donnée ait telle ou telle valeur. A ce titre, certains concepts de la mécanique statistique, tels que la valeur moyenne ou la dispersion (= écart quadratique moyen) d'une grandeur, vont être retrouvées en mécanique quantique. Par ailleurs, étant donné un vecteur-ket $|\Psi\rangle$ normé décrivant l'état du système, comment utiliser cette notion mathématique pour mesurer la grandeur $\mathcal{A}$? par exemple la position du système.

Supposons que le spectre de A est discret et notons par $|\Phi_n\rangle$ le vecteur propre de A associé à la valeur propre a_n. En statistique la valeur moyenne <$\mathcal{A}$> de la grandeur $\mathcal{A}$ est définie par :

$$<\mathcal{A}> = \sum_n \mathcal{P}(a_n) a_n$$

En utilisant le postulat de décomposition spectrale, on obtient sans difficultés :

<$\mathcal{A}$> = $\langle\Psi|A|\Psi\rangle$ qui est bien une quantité réelle puisque A est hermitique.

Remarques :

* Dans le cas où le spectre de A est continu, on montre que la valeur moyenne de $\mathcal{A}$ est toujours donnée par $\langle\Psi|A|\Psi\rangle$; (pour cela, il suffit de faire intervenir la densité de probabilité).

* La valeur moyenne <$\mathcal{A}$> peut dépendre du temps du fait que $|\Psi\rangle$ et/ou A peuvent en dépendre. Par contre, quand un système est dans un état stationnaire, <$\mathcal{A}$> est indépendante du temps à moins que A en dépende explicitement.

Enfin, comme en statistique, la dispersion des résultats est caractérisée par l'écart quadratique $\Delta\mathcal{A}$ moyen tel que :

$$(\Delta\mathcal{A})^2 = <(\mathcal{A} - <\mathcal{A}>)^2> = <\mathcal{A}^2> - <\mathcal{A}>^2 = \langle\Psi|A^2|\Psi\rangle - \left(\langle\Psi|A|\Psi\rangle\right)^2$$

Plus $\Delta\mathcal{A}$ est faible, meilleure sera la précision de la mesure. Pour la position par exemple, plus Δx est faible meilleure sera la localisation de la particule.

2) Evolution dans le temps. Constante du mouvement

Considérons une grandeur physique $\mathcal{A}$ (dépendant explicitement du temps) et soit A(t) l'observable correspondante. La vitesse de variation pendant le temps dt de la valeur moyenne <$\mathcal{A}$> de $\mathcal{A}$ est :

$$\frac{<\mathcal{A}>_{t+dt} - <\mathcal{A}>_t}{dt} = \frac{d}{dt}<\mathcal{A}> = \frac{d}{dt}\left(\langle\Psi_t|A|\Psi_t\rangle\right)$$

En utilisant l'équation de Schrödinger, on établit sans difficultés :

$$\boxed{\frac{d}{dt}<\mathcal{A}> = \frac{1}{i\hbar}<[A(t), H(t)]> + <\frac{\partial\mathcal{A}}{\partial t}>}$$

où H(t) est le hamiltonien du système.

En particulier, dans le cas où A est indépendante du temps, la vitesse de variation dans le temps de la valeur moyenne de la grandeur $\mathcal{A}$ s'identifie (au coefficient $1/i\hbar$ près) à la valeur moyenne de l'opérateur [A,H] dans l'état du système.

Par définition, $\mathcal{A}$ est dite une constante du mouvement si :

i) $\mathcal{A}$ ne dépend pas explicitement du temps $\rightarrow \frac{\partial\mathcal{A}}{\partial t} = \mathbf{0}$

ii) [A,H] = 0

alors $\frac{d}{dt}<\mathcal{A}> = 0$ et par conséquent <$\mathcal{A}$> n'évolue pas quelque soit l'état du système.

Dans ce cas, la probabilité de trouver pour la mesure de $\mathcal{A}$ tel ou tel résultat reste invariable au cours du temps. La valeur propre de A ainsi que celle de H sont qualifiées de "bons nombres quantiques".

V. THEOREME DE HEISENBERG

1. Relations de commutation

- Si [A, B] = 0, on sait alors qu'il existe un système orthonormé complet de vecteurs propres communs à A et B; soit :

$$A\,|\varphi_n\rangle = a_n\,|\varphi_n\rangle \quad \text{et} \quad B\,|\varphi_n\rangle = b_n|\varphi_n\rangle$$

Si on effectue une mesure de la grandeur A et si on obtient a_n, le système physique sera, après la mesure, dans l'état $|\varphi_n\rangle$ (principe de réduction de paquet d'onde). Si, ensuite, on mesure B, on obtiendra b_n avec certitude sans modification de l'état $|\varphi_n\rangle$. Autrement dit, si l'on connaît A dans l'état $|\varphi_n\rangle$, on peut aussi connaître B dans le même état $|\varphi_n\rangle$. On dit que quelque fois que l'on peut connaître "simultanément" A et B; il faut, en général, éviter ce type de langage (qui ne correspond à rien d'ailleurs). Ces considérations sont généralisables à plusieurs observables commutables et en particulier à un E.C.O.C. : A, B, C,..., P : ayant effectué une mesure de A par exemple, le système se trouve dans l'étrat $|\varphi_n\rangle$ et les mesures ultérieures de B, C,..., P donneront avec une probabilité 1 les valeurs propres b_n, c_n, p_n, relatives à $|\varphi_n\rangle$. Les grandeurs physiques A, B, C, ..., P sont dites compatibles.

- Si [A, B] ≠ 0; mesurons d'abord la grandeur A, le résultat est a_n, une valeur propre de A. après la mesure le système est dans l'état $|\varphi_n\rangle$, vecteur propre de A relative à a_n. Mesurons alors B, on obtiendra la valeur propre b_m (une valeur propre de B), mais le système physique passe à l'état $|\Psi_m\rangle$, vecteur propre de B relatif à la valeur propre b_m. De plus, cette valeur est obtenue avec une probabilité différente de 1 puisque $\mathcal{P}(b_m) = |\langle\Psi_m|\varphi_n\rangle|^2$. La situation est alors toute différente du cas précédent; on dit que les grandeurs A et B sont incompatibles.

Remarque importante : Il ne faut pas confondre le non-déterminisme (c'est-à-dire le fait que la mesure d'une grandeur est associée à une probabilité) introduit par les principes de la mécanique quantique avec les incertitudes que nous supposons d'ailleurs ici parfaites. C'est malheureusement une confusion assez répandue.

2) Énoncé du théorème et démonstration

Enoncé : Le produit des écarts quadratiques moyens de deux grandeurs physiques $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ est au minimum égal à la moitié du module de la valeur moyenne, dans un état quelconque normé, du commutateur des observables correspondantes; soit :

$$\boxed{\Delta\mathcal{A}.\,\Delta\mathcal{B} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\Psi|[A, B]|\Psi\rangle\right|}$$

Démonstration :

Considérons deux observables A et B et introduisons les opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ définis à partir de leur écart–type :

$\hat{A} = A - \langle\mathcal{A}\rangle\mathbb{1}$ et $\hat{B} = B - \langle\mathcal{B}\rangle\mathbb{1}$ avec $\langle\mathcal{A}\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle$ et de même pour $\langle\mathcal{B}\rangle$.

Considérons maintenant le ket : $(\hat{A} + i\lambda\,\hat{B})\,|\Psi\rangle$ où λ est un nombre réel. La norme au carré de ce ket est :

$\langle\Psi|(\hat{A} + i\lambda\,\hat{B})^+(\hat{A} + i\lambda\,\hat{B})\,|\Psi\rangle = \langle\Psi|(\hat{A} - i\lambda\,\hat{B})^+(\hat{A} + i\lambda\,\hat{B})\,|\Psi\rangle$ qui est positive ou nulle.

En développant, on obtient :

$$\lambda^2\langle\Psi|\hat{B}^2|\Psi\rangle + i\lambda\langle\Psi|[\hat{A},\hat{B}]|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle \geq 0$$

Or $[\hat{A},\hat{B}] = [A,B]$ et il faut remarquer que [A,B] est un opérateur antihermitique, en effet : $[A,B]^+ = -[A,B]$ et on peut poser [A,B] = i K pour disposer d'un opérateur hermitique ($K^+=K$).
L'inéquation ci-dessus devient alors :

$$\lambda^2\langle\Psi|\hat{B}^2|\Psi\rangle - \lambda\langle\Psi|K|\Psi\rangle + \langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle \geq 0$$

ou encore : $\lambda^2 < \hat{\mathcal{B}}^2 > -\lambda < \mathcal{K} > + < \hat{\mathcal{A}}^2 > \geq 0$ avec $\mathcal{K}$ la grandeur représentée par K.
Le discriminant de ce trinôme est donc négatif ou nul soit :

$$(<\mathcal{K}>)^2 - 4 < \hat{\mathcal{A}}^2 >< \hat{\mathcal{B}}^2 > \leq 0 \Rightarrow < \hat{\mathcal{A}}^2 >< \hat{\mathcal{B}}^2 > \geq \frac{1}{4}(<\mathcal{K}>)^2$$

Un calcul immédiat donne : $< \hat{\mathcal{A}}^2 > = (\Delta\mathcal{A})^2$ et $< \hat{\mathcal{B}}^2 > = (\Delta\mathcal{B})^2$
Et on obtient finalement :

$$\Delta\mathcal{A}\cdot\Delta\mathcal{B} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\Psi|K|\Psi\rangle\right| \quad \text{soit : } \Delta\mathcal{A}\cdot\Delta\mathcal{B} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\Psi|[A,B]|\Psi\rangle\right|$$

- Si A et B commutent, on a alors $\Delta\mathcal{A}\cdot\Delta\mathcal{B} \geq 0$; ce qui est une évidence. Cela signifie qu'il n'ya pas de relations entre ΔA et ΔB ; ces "incertitudes" statistiques sont indépendantes. Autrement dit, la mesure de A n'influe pas sur la mesure de B.

- Si A et B ne commutent pas, $\Delta\mathcal{A}$ et $\Delta\mathcal{B}$ sont liées entre elles par une relation dite d'incertitudes, très mal nommées car elle n'exprime pas une relation entre les incertitudes de la mesure expérimentale, mais au contraire les limites prédites (avec certitude) par la théorie quantique.

3) Applications

a) Relations d'incertitude spatiales

Prenons $\mathcal{A} = x$ et $\mathcal{B} = p_x$ ===> A = X et $B = P_x$

Or on sait que $[X,P_x] = i\hbar\mathbb{1}$; donc :

$$\boxed{\Delta x \,.\, \Delta p_x \geq \hbar/2}$$

De même pour les autres composantes on aura :

$$\boxed{\Delta y \,.\, \Delta p_y \geq \hbar/2 \quad \text{et} \quad \Delta z \,.\, \Delta p_z \geq \hbar/2}$$

Les trois inégalités encadrées constituent ce que l'on convient d'appeler les relations d'incertitude spatiales de Heisenberg. Elles ont des conséquences physiques que l'on peut évoquer de la façon suivante :

* Ces relations affirment que l'on ne peut pas connaître en même temps avec une grande précision la position et l'impulsion de la particule c'est à dire si l'on affine le résultat de la précision d'une mesure de la position, c'est au détriment de la mesure de l'impulsion et inversement.

* Ces inégalités n'expriment pas des relations entre les incertitudes de la mesure expérimentale mais au contraire, elles donnent les limites prédites par la théorie quantique: le Δx (ou le Δp_x) de l'inégalité de Heisenberg n'est pas d'origine expérimentale contrairement à une terminologie très répandue; il traduit une dispersion intrinsèque de la position (ou de l'impulsion) qui ne doit rien à notre ignorance ou à notre maladresse. Autrement dit, une grandeur physique comme la position ou l'impulsion peut être classiquement mal connue du fait d'une incertitude expérimentale alors que quantiquement cette grandeur n'a pas une valeur unique.

* Ces relations ne peuvent pas être testées dans le domaine macroscopique à cause de la petitesse de la constante h. En effet, supposons que pour un plomb de chasse de 1g, on ait $(\Delta x)_{exp.}$=1mm et $(\Delta v_x)_{exp.}$= 1mm/s soit $(\Delta x)_{exp.}.(\Delta p_x)_{exp.} = 10^{-15}$ L = 10^{19} h >>h. Il faudrait donc améliorer fantastiquement la précision expérimentale avec laquelle les grandeurs classiques sont déterminées avant d'atteindre les limitations imposées par les dispersions quantiques intrinsèques. Cet exemple doit faire comprendre une fois encore que les dispersions quantiques n'ont rien avoir avec des incertitudes expérimentales ou avec la précision des instruments de mesure.

b) Relation d'incertitude temporelle (ou la 4ème relation d'incertitude)

Posons $\mathcal{B} = \mathcal{H}$ hamiltonien du système ===> $(\Delta\mathcal{H})^2 = <\mathcal{H}^2> - <\mathcal{H}>^2 = (\Delta E)^2$.

L'application du théorème de Heisenberg donne :

$$\Delta\mathcal{A}\,.\,\Delta E \geq \frac{1}{2}\left|\langle\Psi|[A,H]|\Psi\rangle\right| \qquad (*)$$

Or nous avons établi que :

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}<[A(t),H(t)]> + \langle\Psi|\frac{\partial A}{\partial t}|\Psi\rangle >$$

soit pour une grandeur ne dépendant pas explicitement du temps:

$$\langle\Psi|[A,H]|\Psi\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}\langle\Psi|A|\Psi\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}<\mathcal{A}>$$

En portant dans (*) et en posant $\tau = dt.(\Delta\mathcal{A}/d<\mathcal{A}>)$, grandeur homogène à un temps, on obtient :

$$\boxed{\Delta E\,.\,\tau \geq \hbar/2}$$

C'est la relation d'incertitude temporelle de Heisenberg.

Cette nouvelle inégalité relie l'extension en énergie d'un système à sa durée d'évolution caractéristique. Le contenu totalement nouveau par rapport à la physique classique réside dans l'impossibilité d'avoir une valeur unique bien déterminée de l'énergie d'un système, même isolé, à tout instant.

Toutefois dans le cas particulier et important d'un système conservatif se trouvant dans un état propre de H, on sait que son énergie y est parfaitement définie et est caractérisée par une valeur numérique unique, donc $\Delta E=0$. La relation de Heisenberg exige alors que $\tau=\infty$, ce qui signifie que le système demeure infiniment dans cet état; c'est ce que nous avons déjà établi: un tel état est stationnaire.

Dans le cas d'un système instable, τ est considérée comme la durée de vie de l'état du système (quantité finie) et la relation indique alors que l'énergie sera connue au minimum avec une "incertitude" $\Delta E = \hbar/2\tau$. En particulier, si le système est dans un état de longue durée, l'incertitude théorique sur l'énergie est très faible.

Enfin, d'après la définition de τ, on voit que pour un système se trouvant dans un état stationnaire ($\tau=\infty$), on aura $d<\mathcal{A}>/dt=0$, c'est à dire que toute grandeur $\mathcal{A}$ (ne dépendant pas explicitement du temps) attachée à ce système est une constante de mouvement.